

〈分子動力学とナノテクノロジー〉 課題

(締切・提出: 12月16日(月)15時, 機械系事務室レポート box)

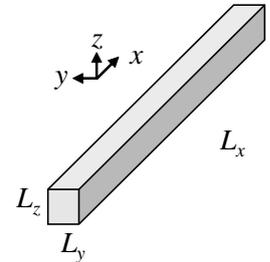
千足 (2013年12月10日出題)

http://www.photon.t.u-tokyo.ac.jp/~chiashi/files/13MD-Nano_report01.pdf

右図に示したような1次元構造に閉じ込められた自由電子の電子構造を考える。ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ が,

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & (0 < y < L_y \wedge 0 < z < L_z) \\ \infty & (\text{else}) \end{cases}$$

であり, $L_x \rightarrow \infty$ とし, L_y および L_z は十分に小さいとする。また, 電子の波数ベクトルを $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ とする。



(1) 整数 n_y, n_z を用いて波数ベクトルが

$$\begin{cases} k_y = \frac{\pi}{L_y} n_y \\ k_z = \frac{\pi}{L_z} n_z \end{cases}$$

と離散的になることを示せ。また整数 n_y, n_z の取り得る範囲を求めよ。

(2) 電子状態密度 $D(E)$ を求め, (定性的な) グラフを図示せよ。